10 Kanonische Bewegungsgleichungen – Hamiltonsche Dynamik

Bei der Diskussion des Hamiltonschen Prinzips war die Lagrange-Funktion $L(q_i, \dot{q}_i; t)$ von zentraler Bedeutung. Obwohl der Lagrange-Formalismus sowohl vom praktischen Standpunkt betrachtet die Beschreibung vieler Systeme vereinfacht als auch viele der Mechanik zugrundeliegende Strukturen offenbart, verbleiben gewisse strukturelle Defizite.

So wird z.B. die Abhängigkeit der Funktion L von q und $\dot{q}$ einerseits unabhängig voneinander betrachtet, andererseits sind q und $\dot{q}$ durch Zeitableitung miteinander verknüpft.

Des Weiteren bestimmt die Wahl eines Punktes im Konfigurationsraum q_i die Dynamik eines Systemes noch nicht vollständig, da verschiedene Trajektorien durch denselben Punkt im Konfigurationsraum mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten laufen kann.

10.1 Kanonische Bewegungsgleichungen

Diese "Mängel" werden in der kanonischen Formulierung der Mechanik behoben, die gleichzeitig die formale Grundlage für Strukturen der Quantenmechanik liefert.

Als alternative dynamische Variable zu $\dot{q}_j$ bietet sich der kanonische Impuls an,

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \qquad (10.1)$$

Die Lagrange-Bewegungsgleichung $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} = \frac{\partial L}{\partial q_j}$ schreibt sich dann unmittelbar

$$\dot{p}_j = \frac{\partial L}{\partial q_j}. \qquad (10.2)$$

Es sei zudem an die Hamilton-Funktion erinnert,

$$H = \sum_j p_j \dot{q}_j - L , \qquad (10.3)$$

die unter bestimmten Voraussetzungen der Gesamtenergie entspricht und zeitlich erhalten ist.

Um nun die verallgemeinerten Geschwindigkeiten $\dot{q}_j$ als Variable loszuwerden, können wir (10.1) implizit nach $\dot{q}_j$ auflösen:

$$p_j = \frac{\partial L(q_j, \dot{q}_j; t)}{\partial \dot{q}_j} \quad \Rightarrow \quad \dot{q}_j = \dot{q}_j(q_j, p_j; t) \qquad (10.4)$$

Einsetzen von (10.4) in (10.3) liefert die Hamilton-Funktion als Funktion von q_j und p_j,

$$H(q_j, p_j; t) = \sum_j p_j \dot{q}_j - L(q_j, \dot{q}_j; t) \qquad (10.4)$$

$$\text{mit} \quad \dot{q}_j = \dot{q}_j(q_j, p_j; t)$$

(NB: (10.4) definiert eine "Legendre-Transformation".)

Im Folgenden wollen wir immer die Hamiltonfunktion als Funktion der Variablen q_j und p_j (und t) betrachten. Die Menge aller q_j und p_j eines Systems bildet den "Phasenraum".

Das totale Differential von H lautet

$$dH = \sum_k \left(\frac{\partial H}{\partial q_k} dq_k + \frac{\partial H}{\partial p_k} dp_k \right) + \frac{\partial H}{\partial t} dt \qquad (10.5)$$

Gemäß der Definition (10.4) gilt ebenfalls

$$dH = \sum_k \Bigg(\dot{q}_k dp_k + \cancel{p_k d\dot{q}_k} - \underbrace{\frac{\partial L}{\partial q_k}}_{=\dot{p}_k} dq_k - \cancel{\underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}}_{p_k} d\dot{q}_k} \Bigg) - \frac{\partial L}{\partial t} dt \qquad (10.6)$$

$$= \sum_k \left(\dot{q}_k dp_k - \dot{p}_k dq_k \right) - \frac{\partial L}{\partial t} dt \qquad (10.7)$$

Da die Differenziale dp_k, dq_k, dt unabhängig voneinander sind und beliebig gewählt werden können, folgt aus (10.5) und (10.7) per Koeffizientenvergleich

$$\boxed{\begin{aligned} \dot{q}_n &= \frac{\partial H}{\partial p_n} \\ \dot{p}_n &= -\frac{\partial H}{\partial q_n} \end{aligned}}$$ Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (10.8)

sowie
$$-\frac{\partial L}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t} \quad . \tag{10.9}$$

Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen werden wegen der gleichberechtigten Behandlung von q_n und p_n auch kanonische Bewegungsgleichungen genannt.

Hat ein System s Freiheitsgrade q_k, $k=1,\dots,s$, so wird seine Dynamik durch die $2s$ Hamiltonschen Bewegungsgleichungen beschrieben, die jeweils Differentialgleichungen 1. Ordnung sind (im Vergleich zu s Bewegungsgleichungen 2. Ordnung in der Lagrange-Formulierung.)

Für die totale Zeitableitung von H folgt aus (10.5):

$$\frac{dH}{dt} = \sum_k \left(\underbrace{\frac{\partial H}{\partial q_k}}_{=-\dot{p}_k} \underbrace{\frac{dq_k}{dt}}_{\dot{q}_k} + \underbrace{\frac{\partial H}{\partial p_k}}_{\dot{q}_k} \underbrace{\frac{dp_k}{dt}}_{\dot{p}_k} \right) + \frac{\partial H}{\partial t}$$

$$\Rightarrow \frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} \, , \qquad (10.10)$$

d.h. die Hamiltonfunktion ist eine Erhaltungsgröße, falls sie explizit zeitunabhängig ist, $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$.

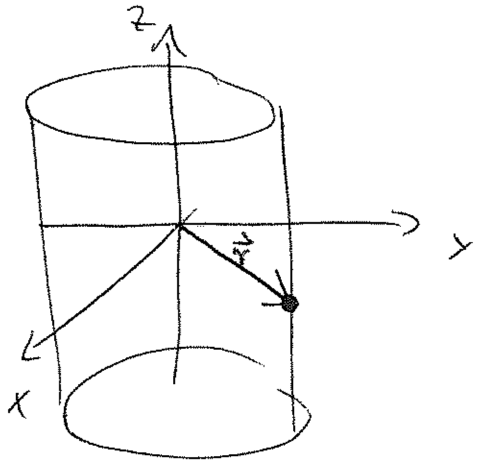
In früheren Kapiteln haben wir bereits diskutiert, dass $H = E$ (gesamte Energie) $= T + U$ gilt, sofern das Potential nicht von der Geschwindigkeit abhängt und die Transformation von karthesischen auf generalisierte Koordinaten nicht explizit von der Zeit abhängt.

Beispiel:

Wir betrachten die Bewegung eines Massepunkts auf einer Zylinderoberfläche

$$x^2 + y^2 = R^2 \, . \qquad (10.11)$$

Zusätzlich wird der Massepunkt zum Zentrum hin angezogen:



$$\vec{F} = -k\vec{r} \qquad \text{(Harmonisches Kraftgesetz)} \tag{10.12}$$

Das zugehörige Potential ist

$$U = \frac{1}{2}kr^2 = \frac{1}{2}k\left(x^2+y^2+z^2\right) = \frac{1}{2}k\left(R^2+z^2\right) \tag{10.13}$$

Die Geschwindigkeit in zylindrischen Koordinaten lautet

$$v^2 = \dot{\rho}^2 + \rho^2\dot{\theta}^2 + \dot{z}^2 \tag{10.14}$$

Wegen $\rho = R = \text{const}$, folgt $\dot{\rho} = 0$, so dass die kinetische Energie gegeben ist durch

$$T = \frac{1}{2}m\left(R^2\dot{\theta}^2 + \dot{z}^2\right). \tag{10.15}$$

Daraus können wir die Lagrange-Dichte

konstruieren

$$L = T - U = \frac{1}{2} m(R^2 \dot{\theta}^2 + \dot{z}^2) - \frac{1}{2} k(R^2 + z^2) \tag{10.16}$$

Betrachten wir θ und z als verallgemeinerte Koordinaten, dann sind die zugehörigen kanonischen Impulse:

$$p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = mR^2 \dot{\theta}$$
$$p_z = \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} = m \dot{z} \tag{10.17}$$

Die Geschwindigkeiten lassen sich nun nach den Impulsen auflösen,

$$\dot{\theta} = \frac{p_\theta}{mR^2}, \quad \dot{z} = \frac{p_z}{m}, \tag{10.18}$$

und die Hamiltonfunktion folgt (gemäß Legendre-Transformation

$$H = p_\theta \dot{\theta} + p_z \dot{z} - L \Big|_{\substack{\dot{\theta} \to p_\theta \\ \dot{z} \to p_z}} = \frac{p_\theta^2}{mR^2} + \frac{p_z^2}{m} - L \tag{10.19}$$

$$= \frac{p_\theta^2}{mR^2} + \frac{p_z^2}{m} - T + U$$

Mit

$$T = \frac{1}{2} m\left(R^2 \dot{\theta}^2 + \dot{z}^2\right) \overset{(10.18)}{=} \frac{1}{2} m\left(\frac{p_\theta^2}{m^2 R^2} + \frac{p_z^2}{m^2}\right), \qquad (10.20)$$

erhalten wir

$$H = \frac{1}{2}\frac{p_\theta^2}{mR^2} + \frac{1}{2}\frac{p_z^2}{m} + \frac{1}{2} k\left(R^2 + z^2\right)$$

$$\equiv T + U \qquad \text{(wie erwartet)} \qquad (10.21)$$

Die kanonischen Bewegungsgleichungen folgen unmittelbar:

$$(1) \quad \dot{p}_\theta = -\frac{\partial H}{\partial \theta} = 0$$

$$(2) \quad \dot{p}_z = -\frac{\partial H}{\partial z} = -kz$$

$$(3) \quad \dot{\theta} = \frac{\partial H}{\partial p_\theta} = \frac{p_\theta}{mR^2} \qquad (10.22)$$

$$(4) \quad \dot{z} = \frac{\partial H}{\partial z} = \frac{p_z}{m}$$

Die ~~letzten~~ beiden Gleichungen reproduzieren (10.17/8).
Während (10.17) jedoch im Lagrange-Formalismus eine Definition ist, sind (3) & (4) ein Ergebnis des

Hamilton-Formalismus.

(1) & (3) zusammen besagen, dass

$$p_\theta = mR^2\dot{\theta} = \text{const} \quad . \qquad (10.23)$$

gilt, was der Drehimpulserhaltung um die z-Achse entspricht. (2) & (4) liefern schließlich

$$\ddot{z} + \omega_0^2 z = 0 \quad \text{mit} \quad \omega_0^2 = \frac{k}{m} \quad . \qquad (10.24)$$

Die Bewegung in z-Richtung ist also eine harmonische Schwingung.

10.2 Poisson-Klammern

Da die Dynamik eines Hamiltonschen systems durch die Zeitentwicklung im Phasenraum bestimmt ist, ist jede physikalische Größe als Funktion der Phasenraumvariablen bestimmbar. Solche allgemeine Funktionen $f(q_j, p_j; t)$ heißen Observable.

Ihre Zeitableitung lautet

$$\frac{df}{dt} = \sum_{j=1}^{s} \left(\frac{\partial f}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial f}{\partial p_j} \dot{p}_j \right) + \frac{\partial f}{\partial t} \tag{10.25}$$

Verwendung der kanonischen Gleichungen führt auf

$$\frac{df}{dt} = \sum_j \left(\frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} \right) + \frac{\partial f}{\partial t} . \tag{10.26}$$

Die hier auftretende Struktur fasst man in der Definition der Poisson-Klammer zusammen. Für zwei beliebige Observable $f(q_j, p_j, t)$, $g(q_j, p_j, t)$ ist diese definiert durch

$$\{f, g\} := \sum_j \left(\frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial g}{\partial p_j} - \frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial g}{\partial q_j} \right) \tag{10.27}$$

Damit lässt sich die Zeitevolution von f in der kompakten Form

$$\frac{df}{dt} = \{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial t} \tag{10.28}$$

schreiben. Diese Notation verdeutlicht die Relevanz der Hamilton-Funktion, die die Zeitentwicklung aller Observablen steuert.

Mit der Poisson-Klammer können nun auch Erhaltungssätze in kompakter Form geschrieben werden. Nach (10.28) ist eine nicht explizit zeitabhängige Observable f genau dann eine Erhaltungsgröße, wenn ihre Poisson-Klammer mit der Hamilton-Funktion verschwindet:

$$\{f, H\} = 0 \iff \frac{df}{dt} = 0 \quad \left(\text{falls } \frac{\partial f}{\partial t} = 0\right) \tag{10.29}$$

Ein einfaches Beispiel ist offensichtlich eine nicht explizit zeitabhängige Hamiltonfunktion H, $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$, für die bereits aus der Definition (10.27) folgt

$$\{H, H\} = 0 \quad , \tag{10.30}$$

d.h. solche Hamiltonfunktionen sind zeitlich erhalten.

Betrachten wir die Beispiele

$$f(q,p;t) = q_j \quad \text{oder} \quad p_j ,$$

so finden wir durch direktes nachrechnen,

$$\underline{\frac{dq_j}{dt} = \{q_j, H\}} \overset{(10.27)}{=} \frac{\partial H}{\partial p_j} \qquad (10.31)$$

bzw.

$$\underline{\frac{dp_j}{\partial t} = \{p_j, H\}} = -\frac{\partial H}{\partial q_j} , \qquad (10.32)$$

d.h. die Bewegungsgleichungen lassen sich durch die Poisson-Klammern ausdrücken.

Werfen wir einen näheren Blick auf (10.32):

$$\dot{p}_j = \sum_i \Big(\underbrace{\frac{\partial p_j}{\partial q_i}}_{=0} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \underbrace{\frac{\partial p_j}{\partial p_i}}_{=\delta_{ij}} \frac{\partial H}{\partial q_i} \Big) = -\frac{\partial H}{\partial q_j} , \qquad (10.33)$$

dann ist der kanonische Impuls p_j erhalten, $\dot{p}_j = 0$, genau dann, wenn H nicht von q_j abhängt, $\frac{\partial H}{\partial q_j} = 0$.

Aus der Definition der Hamilton-Funktion

$$H = \sum_j p_j \dot{q}_j - L(q,\dot{q};t) \text{ (aufgefasst als Funktion von } q, \dot{q}\text{)}$$

ist erkennbar, das dies zutrifft, wenn

$$\frac{\partial H}{\partial q_j} = -\frac{\partial L}{\partial q_j} = 0 , \qquad (10.34)$$

d.h. wenn q_j eine zyklische Koordinate ist.

Hier stoßen wir wieder auf einen Zusammenhang zwischen Symmetrien und Erhaltungsgrößen:
Ist $H(q_1, \dots q_s, p_1, \dots p_s)$ invariant unter bel. Verschiebung einer Phasenraumkoordinate, z.B. $q_j \Rightarrow q_j + \Delta q_j$,

d.h.

$$H(q_1, \dots q_j \dots, q_s, p_1, \dots p_s) = H(q_1 \dots q_j + \Delta q_j, p_1 \dots p_s),$$

dann ist $\frac{\partial H}{\partial q_j} = 0$ und der zugehörige kanonische Impuls ist erhalten $\dot{p}_j = 0$.

Abschließend listen wir wichtige Eigenschaften der Poisson-Klammer auf, die direkt aus der Definition folgen:

a) Linearität

$$\{c_1 f + c_2 g, h\} = c_1 \{f, h\} + c_2 \{g, h\} \qquad (10.35)$$

b) Antisymmetrie

$$\{f, g\} = -\{g, f\} \qquad (10.36)$$

c) Existenz eines Nullelements: $\{c, f\} = 0$ mit $c = \text{const.}$

(10.37)

d) Produktregel:

$$\{fg, h\} = f\{g, h\} + \{f, h\} g \qquad (10.38)$$

Da diese Regel der Leipniz-Regel von Ableitngen ähnelt, zählt die Poisson-Klamme mathematisch auch zu den Derivationen.

e) Jacobi-Identität

$$\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0 \qquad (10.39)$$

f) Fundamentale Poisson-Klammern:

$$\{q_i, q_j\} = 0 = \{p_i, p_j\}$$
$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \qquad (10.40)$$

Aus der Jacobi-Identität folgt z.B.:
sind f und g Erhaltungsgrößen, so ist auch $\{f, g\}$ eine Erhaltungsgröße:

$$\{\{f, g\}, H\} = -\{\underbrace{\{g, H\}}_{=0}, f\} - \{\underbrace{\{H, f\}}_{=0}, g\} = 0 \qquad (10.41)$$

Neben ihrer Bedeutung in der klassischen Mechanik, findet sich die gleiche Algebraische Struktur der Poisson-Klammern auch in der Quantenmechanik in Form der <u>Kommutatoren</u> wieder.